## § 109. Матричные элементы при сложении моментов

Рассмотрим снова систему, состоящую из двух частей (о которых будем говорить как о подсистемах 1 и 2), и пусть $f_{kq}^{(1)}$ — сферический тензор, характеризующий первую из них. Его матричные элементы по отношению к волновым функциям этой же подсистемы определяются, согласно (107,6), формулой

$$\langle n_1' j_1' m_1' | f_{kq}^{(1)} | n_1 j_1 m_1 \rangle = \\ = i^k (-1)^{j_{1\,\max} - m_1'} \begin{pmatrix} j_1' & k & j_1 \\ -m_1' & q & m_1 \end{pmatrix} \langle n_1' j_1' \| f_k^{(1)} \| n_1 j_1 \rangle. \qquad (109,1)$$

Возникает вопрос о вычислении матричных элементов этих же величин по отношению к волновым функциям системы в целом; покажем, как они могут быть выражены через те же приведенные матричные элементы, которые фигурируют в выражениях (109,1).

Состояния системы в целом определяются квантовыми числами $j_1 j_2 J M n_1 n_2$ ($J$, $M$ — величина и проекция момента всей системы). Поскольку $f_{kq}^{(1)}$ относится к подсистеме 1, ее оператор коммутирует с оператором момента подсистемы 2. Поэтому ее матрица диагональна по $j_2$; она диагональна также и по остальным квантовым числам $n_2$ этой подсистемы. Эти индексы ($j_2$, $n_2$) мы будем для краткости опускать и будем писать искомые матричные элементы в виде

$$\langle n_1' j_1' J' M' | f_{kq}^{(1)} | n_1 j_1 J M \rangle.$$

Согласно (107,6) их зависимость от числа $M$ определяется формулой

$$\langle n_1' j_1' J' M' | f_{kq}^{(1)} | n_1 j_1 J M \rangle = \\ = i^k (-1)^{J_{\max} - M'} \begin{pmatrix} J' & k & J \\ -M' & q & M \end{pmatrix} \langle n_1' j_1' J' \| f_k^{(1)} \| n_1 j_1 J \rangle. \qquad (109,2)$$

Для установления связи между приведенными матричными элементами в правых сторонах (109,1) и (109,2) пишем, по определению матричных элементов:

$$\langle n_1' j_1' J' M' | f_{kq}^{(1)} | n_1 j_1 J M \rangle = \int \psi_{J'M'}^* \hat{f}_{kq}^{(1)} \psi_{JM}\, dq = \\ = \sum_{m_1 m_1'} (-1)^{j_1' - j_2 + M' - M} \sqrt{(2J'+1)(2J+1)} \begin{pmatrix} j_1' & j_2 & J' \\ m_1' & m_2 & -M' \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix} \langle n_1' j_1' m_1' | f_{kq}^{(1)} | n_1 j_1 m_1 \rangle.$$

Подставив сюда (109,1), (109,2) и сравнив полученное соотношение с формулой (108,4), мы увидим, что отношение приведенных матричных элементов (в (109,1), (109,2)) должно быть пропорционально определенному $6j$-символу. Тщательное сравнение обоих указанных соотношений приводит к следующей окончательной формуле:

$$\langle n_1'j_1'J' \| f_k^{(1)} \| n_1 j_1 J\rangle = (-1)^{j_{1\,\max}+j_2+J_{\min}+k} \sqrt{(2J+1)(2J'+1)} \times \\ \times \begin{Bmatrix} j_1' & J' & j_2 \\ J & j_1 & k \end{Bmatrix} \langle n_1'j_1' \| f_k^{(1)} \| n_1 j_1\rangle \tag{109,3}$$

(здесь $j_{1\,\max}$ — большее из $j_1$, $j_1'$; $J_{\min}$ — меньшее из $J$, $J'$). Аналогичная формула для приведенных матричных элементов сферического тензора, относящегося к второй подсистеме:

$$\langle n_2'j_2'J' \| f_k^{(2)} \| n_2 j_2 J\rangle = (-1)^{j_1+j_{2\,\min}+J_{\max}+k} \sqrt{(2J+1)(2J'+1)} \times \\ \times \begin{Bmatrix} j_2' & J' & j_1 \\ J & j_2 & k \end{Bmatrix} \langle n_2'j_2' \| f_k^{(2)} \| n_2 j_2\rangle. \tag{109,4}$$

Отсутствие полной симметрии между выражениями (109,3) и (109,4) (в показателе степени у $-1$) связано с зависимостью фазы волновых функций от порядка сложения моментов. Эту разницу надо иметь в виду, если приходится вычислять матричные элементы одновременно для обеих подсистем.

Далее, найдем полезную формулу для матричных элементов по отношению к волновым функциям всей системы от скалярного произведения (см. определение (107,4)) двух сферических тензоров одинакового ранга $k$, относящихся к различным подсистемам (и потому коммутирующих друг с другом). Согласно (107,10) эти матричные элементы выражаются через приведенные матричные элементы каждого из тензоров (по отношению к волновым функциям системы в целом) следующим образом:

$$\langle n_1'n_2'j_1'j_2'JM | (f_k^{(1)}f_k^{(2)})_{00} | n_1 n_2 j_1 j_2 JM\rangle = \\ = \frac{1}{2J+1} \sum_{J''} \langle n_1'j_1'J \| f_k^{(1)} \| n^1 j_1 J''\rangle \langle n_2'j_2'J'' \| f_k^{(2)} \| n_2 j_2 J\rangle$$

(здесь использовано, что матрица величины, относящейся к одной из подсистем, диагональна по квантовым числам другой подсистемы). Подставив сюда (109,3), (109,4) и воспользовавшись формулой суммирования (108,8), получим искомую формулу, выражающую матричные элементы скалярного произведения через приведенные матричные элементы каждого из тензоров по отношению к волновым функциям соответствующих подсистем:

$$\langle n_1'n_2'j_1'j_2'JM | (f_k^{(1)}f_k^{(2)})_{00} | n_1 n_2 j_1 j_2 JM\rangle = \\ = (-1)^{j_{1\,\min}+j_{2\max}+J} \begin{Bmatrix} J & j_2' & j_1' \\ k & j_1 & j_2 \end{Bmatrix} \langle n_1'j_1' \| f_k^{(1)} \| n_1 j_1\rangle \langle n_2'j_2' \| f_k^{(2)} \| n_2 j_2\rangle. \tag{109,5}$$